SARDIGNA CHIRCAS
SARDEGNA RICERCHE

REGIONE AUTÒNOMA DE SARDIGNA
REGIONE AUTONOMA DELLA SARDEGNA

PortoConte Ricerche

SCIENTIFIC SCHOOL: "NMR IN DRUG DISCOVERY"

22-24 SETTEMBRE 2025

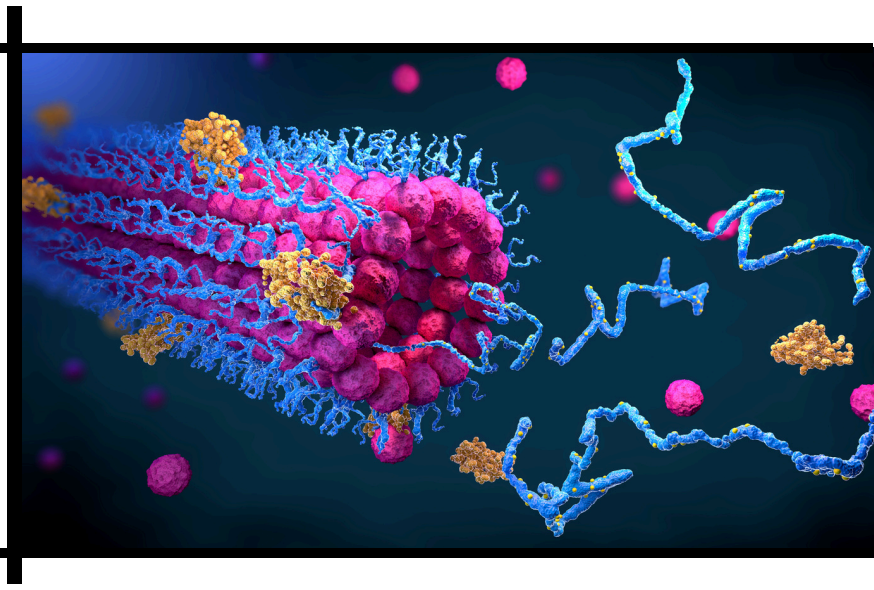
PARCO SCIENTIFICO E TECNOLOGICO SARDEGNA RICERCHE
EDIFICIO. 2 - PULA (CAGLIARI)

22 SETTEMBRE - GIORNO 1 - INTRODUZIONE SULLA SPETTROSCOPIA NMR IN DRUG DISCOVERY

8:45 Accoglienza e registrazione dei partecipanti
10:00 Introduzione al Corso
10:15 Principi generali della spettroscopia di Risonanza Magnetica Nucleare (momento angolare di spin, momento magnetico, magnetizzazione macroscopica, livelli energetici); parametri NMR (chemical shift, larghezza di riga, area del segnale, accoppiamento scalare) **Daniel Oscar Cicero - Università Tor Vergata Roma**
11:45 Pausa caffè
12:15 Il rilassamento nucleare; l'effetto Overhauser nucleare (NOE). - La spettroscopia NMR multidimensionale **Daniel Oscar Cicero - Università Tor Vergata Roma**
13:00 Light Lunch
14:00 Caratterizzazione NMR di piccole molecole: esperimenti 1D e 2D necessari e strategie per l'assegnazione e interpretazione degli spettri **Alfonso Mangoni - Università degli Studi di Napoli "Federico II"**
15:30 Pausa caffè
16:00 Uso della spettroscopia NMR per lo studio di piccole molecole in soluzione: esempi pratici **Alfonso Mangoni - Università degli Studi di Napoli "Federico II"**
17:00 Discussione
19:00 Aperitivo sociale

23 SETTEMBRE - GIORNO 2 – LIGAND-OBSERVED BINDING EXPERIMENTS

9:15 Principi della spettroscopia NMR per la caratterizzazione delle interazioni molecolari e introduzione allo studio delle interazioni proteina-ligando mediante esperimenti NMR ligand-observed: Transferred NOE (TrNOE); Saturation Transfer Difference (STD-NMR), (WaterLOGSY), coefficienti di diffusione, teoria ed esempi **Cristina Airoldi - Università degli Studi Milano Bicocca**
11:00 Pausa caffè
11:30 Esperimenti ligand-based in condizioni "non-convenzionali": screening di miscele complesse; on-cell STD NMR. **Cristina Airoldi - Università degli Studi Milano Bicocca**
12:30 Light lunch
13:30 Settaggio degli esperimenti NMR per la caratterizzazione di piccole molecole **Francesca Benevelli (BRUKER)**
15:30 Pausa caffè
16:00 Acquisizione esperimenti basati sulle metodologie Ligand observed **Francesca Benevelli (BRUKER)**
17:00 Discussione



24 SETTEMBRE - GIORNO 3 – PROTEIN-OBSERVED BINDING: STRUTTURA TRIDIMENSIONALE DELLE PROTEINE

9:15 Applicazioni NMR per lo studio delle interazioni proteina-ligando mediante esperimenti protein-observed **Luigi Russo - Università degli Studi della Campania "Luigi Vanvitelli"**
11:00 Pausa caffè
11:30 Metodologie NMR per lo studio di proteine ad alto peso molecolare **Angelo Gallo - Università degli Studi di Torino**
13:00 Light Lunch
14:00 Applicazioni 19F NMR per lo studio delle interazioni molecolari (es. interazione con metalli, interazione proteina-proteina, equilibri conformazionali) **Luigi Russo - Università degli Studi della Campania "Luigi Vanvitelli"**
15:30 Pausa caffè
16:00 Approcci integrati basati sull'utilizzo di metodi computazionali (es. AlphaFold) e parametri NMR (RDCs, chemical Shifts, NOEs) **Gianluca D'Abrosca Link Campus - University, Roma - Università degli Studi della Campania "Luigi Vanvitelli"**
17:00 Sessione di confronto e domande aperte con i docenti
17:30 Conclusione della scuola

CON IL PATROCINIO DI

GIDRM
Gruppo Italiano Discussione Risonanze Magnetiche

INFO E ISCRIZIONI

Sardinia meeting
AZIENDA 2030 PER LO SVILUPPO SOSTENIBILE